

Modélisation de la phase de compaction du procédé CIC à l'échelle mésoscopique

A. ZOUAGHI^a, M. BELLET^a, Y. BIENVENU^b, G. PERRIN^c, D. CEDAT^d, M. BERNACKI^a

^a MINES ParisTech, Centre de Mise en Forme des Matériaux (CEMEF), UMR CNRS 7635, BP 207, 06904 Sophia-Antipolis, France

^b MINES ParisTech, Centre des Matériaux, UMR 7633, BP 87, 91003 Evry Cédex, France

^c AREVA NP, Tour Areva, 92084 Paris La Défense, France

^d AREVA NP, Centre Technique, BP 181, 71205 Le Creusot Cédex, France

Résumé

La Compaction Isostatique à Chaud (CIC ou Hot Isostatic Pressing HIP en anglais) est un procédé de compaction de poudre qui consiste à soumettre une enveloppe remplie de poudre à un traitement thermique sous pression isostatique. Dans ce procédé, la déformation viscoplastique des particules est un mécanisme prépondérant. Cependant, la compréhension de l'impact global des conditions aux limites thermo-mécaniques et de la granulométrie de poudre sur la microstructure obtenue après ce mécanisme n'est pas simple. Une méthode éléments finis basée sur l'utilisation de level-sets couplée avec une technique de remaillage est proposée afin de modéliser la déformation viscoplastique des particules de poudre à l'échelle mésoscopique sur un Volume Élémentaire Représentatif (VER). La méthode consiste à générer, dans un maillage éléments finis, un empilement de particules sphériques représenté implicitement par des fonctions level-set. Afin d'éviter un coût de calcul important, une adaptation de maillage est également effectuée au niveau des interfaces des particules pour les décrire correctement et gérer la forte discontinuité des propriétés physiques entre les deux sous-domaines (particules et espace inter-particulaire). Les résultats de ce travail sont présentés et discutés.

Abstract

During HIP of metal powder, power-law creep is the dominant mechanism during the densification process. However, the understanding of the global impact of the thermo-mechanical boundary conditions and of the powder granulometry on the microstructure obtained after this first mechanism is not straightforward. A finite element methodology based on the use of a level set framework coupled with a remeshing technique is proposed in order to model the viscoplastic deformation of powder particles during HIP at the mesoscopic scale thanks to a Representative Elementary Volume (REV). The methodology consists in generating, in a finite element mesh, a sphere packing of particles by representing implicitly all particles by means of a limited set of level-set functions. Mesh adaptation is also performed at particle boundaries to describe properly the particles and to manage the discontinuity of the physical properties between the two media (particles and inter-particle space). The inter-particle space is considered as a compressible Newtonian fluid. Such mesoscopic densification simulations are presented and discussed.

Mots clefs : CIC, Compaction de poudre, fonction level-set, technique de remaillage, échelle mésoscopique.

1. Introduction

En raison des possibilités qu'elle offre à la fois d'un point de vue technique mais également économique, le procédé de Compaction Isostatique à Chaud est de plus en plus utilisé dans les

industries Oil and Gas (offshore) et aéronautique. Cette technique permet de produire des pièces métalliques ou céramiques haut de gamme. En effet, ce procédé permet d'obtenir des pièces densifiées de forme plus ou moins complexe et de microstructure uniforme. La CIC consiste à soumettre un conteneur rempli de poudre à un traitement thermique sous pression isostatique appliquée par l'intermédiaire d'un gaz inerte. La modélisation du procédé CIC représente un projet de recherche à la fois ouvert et complexe vu qu'il met en jeu un grand nombre de phénomènes physiques différents. Le mécanisme qui intervient en premier est la déformation viscoplastique des particules. Ensuite, suite à l'évolution de la pression et de la température au cours du temps, plusieurs mécanismes de transport par diffusion apparaissent et deviennent prépondérants [1].

Aujourd'hui, grâce aux progrès considérables des moyens de calculs mais aussi expérimentaux, nous pouvons avoir accès à l'information microscopique et la modéliser. La modélisation à l'échelle d'un volume élémentaire représentatif (VER) permet de mettre en œuvre les différents phénomènes microstructuraux intervenant. Le travail à cette échelle permet d'apporter des éléments de compréhension sur les caractéristiques et la prédiction du comportement des pièces fabriquées et d'étudier l'impact des paramètres du procédé (température, pression, durée des essais, granulométrie,...) sur les caractéristiques finales. Les principaux objectifs de ce travail consistent à modéliser le mécanisme prépondérant en début de CIC, soit celui de la déformation viscoplastique des particules, et à suivre l'évolution de la cinétique de densification à l'échelle d'un VER.

Dans cet article, nous commencerons par présenter les équations du problème mécanique ainsi que les lois de comportement adoptées et les conditions aux limites appliquées. Ensuite, nous présenterons l'approche numérique retenue. Enfin, une dernière partie est dédiée à la présentation et à la discussion des résultats obtenus.

2. Modélisation mécanique

Pour modéliser le procédé CIC à l'échelle mésoscopique, nous avons considéré un Volume Élémentaire Représentatif (VER) en 2D composé de particules de poudre sphériques (matière) et d'un milieu interparticulaire (MI). Le suivi de la déformation des particules représente un des objectifs majeurs de notre modélisation. Ainsi, pour ne pas être obligé de suivre l'évolution du MI aux extrémités libres du domaine, nous avons adopté une description eulérienne.

2.1. Equations générales de la mécanique

Le modèle mécanique est gouverné par l'équation fondamentale de la dynamique et l'équation de conservation de la masse suivantes :

$$\rho \frac{dv}{dt} = \nabla \cdot \sigma + \rho g \quad ; \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v) = 0 \quad , \quad (1)$$

où v désigne la vitesse, σ le tenseur des contraintes, ρ la masse volumique et g l'accélération gravitationnelle.

2.2. Lois de comportement

Le matériau objet de l'étude est un acier inox 316L. La modélisation du mécanisme de déformation viscoplastique des particules est basée sur une loi de type puissance [1][2][3], à savoir :

$$S = 2K(\sqrt{3}\dot{\epsilon})^{m-1} \dot{\epsilon} \quad , \quad (2)$$

où S , $\dot{\epsilon}$ et $\dot{\epsilon}$ représentent respectivement, la partie déviatoire du tenseur des contraintes, la vitesse de déformation et la vitesse de déformation équivalente au sens de Von Mises ($\dot{\epsilon} = \sqrt{\frac{2}{3} \dot{\epsilon} : \dot{\epsilon}}$). K représente la consistance du matériau et m la sensibilité de la contrainte d'écoulement à la vitesse de déformation. K et n sont considérés dépendants de la température [4][5]. Concernant le MI, nous lui attribuons le comportement d'un fluide newtonien ($K=\eta$ et $m=1$ dans l'équation (2)), à savoir :

$$S = 2\eta dev(\dot{\epsilon}) , \quad (3)$$

avec η la viscosité dynamique.

2.3. Coefficient de compressibilité

Afin de mieux approcher le comportement du MI (vide ou quasi-vide en CIC), nous avons résolu les équations de Navier Stokes compressible. Ces dernières sont obtenues en introduisant un terme ($C_k \dot{p}$) dans l'équation de conservation de la masse :

$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + \nabla v \cdot v \right) = \nabla \cdot S - \nabla p + \rho g , \quad (4)$$

$$\nabla \cdot v + C_k \dot{p} = 0 . \quad (5)$$

Pour introduire l'incompressibilité des particules, nous avons adopté des valeurs du coefficient de compressibilité $C_k = \varepsilon$ très proches de 0. Concernant le MI, les valeurs de C_k sont assez importante ($C_k \gg \varepsilon$) pour tenir compte de la compressibilité du milieu.

3. Modélisation numérique

Les simulations numériques présentées ont été réalisées avec la librairie éléments finis C++ "CimLib" développée au CEMEF.

3.1. Méthode level set

Le VER sujet de ce travail est un domaine fixe dans lequel les interfaces entre les différents sous-domaines (particules de poudre, milieu englobant et MI) ne sont connues qu'implicitement à travers les valeurs d'une fonction définie sur tout le domaine de calcul. Cette fonction est une fonction distance signée à l'interface d'intérêt dans le domaine de calcul Ω . La level set α est choisie positive à l'intérieur du sous-domaine (noté ω_i) et négative partout ailleurs. Ainsi, l'isovaleur zéro $\partial \omega_i$ représente l'interface que l'on cherche à déterminer. Cette fonction est définie par la fonction suivante :

$$\alpha(x) = d(x, \partial \omega_i) \text{ si } x \in \omega_i ; \alpha(x) = -d(x, \partial \omega_i) \text{ si } x \in \Omega - \omega_i . \quad (6)$$

Dans un premier temps, vu que toutes les particules ont le même comportement et afin d'éviter un coût de calcul très important, nous avons travaillé avec une seule fonction level-set globale pour toutes les particules. En supposant que chaque particule possède une fonction distance $\alpha_i(x)$ définissant son interface, la fonction $\alpha(x) = \max_i(\alpha_i(x))$ représente la fonction level set globale qui définit l'ensemble de toutes les particules de poudre. En effet, son isovaleur zéro correspond à l'enveloppe de la réunion de toutes les particules. Dans la bibliothèque CimLib, une deuxième fonction level set tronquée 'auto-déterminante' peut être utilisée [6]. Cette fonction permet de ne prendre en compte la fonction level-set qu'aux alentours des interfaces, tout en gardant une bonne régularité. Dans la bibliothèque CimLib, plusieurs solveurs ont été construits pour transporter l'ensemble des lignes de niveau [6].

3.2. Lois de mélange

Les variables ρ , C_k , K et m présentées précédemment sont des variables moyennées par l'intermédiaire d'une fonction de mélange. En supposant que nous avons 2 fonctions level-set : la première caractérisant l'interface des particules et la deuxième les interfaces du milieu englobant, alors les lois de mélange de ces différents paramètres peuvent être présentées sous la forme suivante :

$$\langle M \rangle = [f_1(\alpha)M_{par} + (1 - f_1(\alpha))M_{MI}](1 - f_2(\alpha)) + f_2(\alpha)M_{MEnglobant} , \quad (7)$$

Le choix des fonctions caractéristiques $f_1(\alpha)$ et $f_2(\alpha)$ est très important vu qu'il conditionne la transition des caractéristiques physiques des différents sous domaines du VER. Afin d'avoir une

transition des propriétés plus régulière, nous avons considéré des fonctions caractéristiques définies par la relation suivante :

$$f(\alpha) = 1 \text{ pour } \alpha > e ; f(\alpha) = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\alpha}{e} + \frac{1}{\pi} \sin \left(\pi \frac{\alpha}{e} \right) \right] \text{ pour } |\alpha| < e ; f(\alpha) = 0 \text{ pour } \alpha < -e , \quad (8)$$

avec e épaisseur du mélange souhaitée choisie égale à $2 \cdot h_{\text{mesh}}$.

3.3. Adaptation de maillage

La précision de la méthode des éléments finis dépend de la taille des éléments. Plus ces éléments sont petits plus le calcul est précis et plus les simulations et les résultats seront fiables. Pour des raisons évidentes de coût de calcul, il n'est pas possible de raffiner trop uniformément la taille des éléments. Mais, il est possible d'optimiser le maillage en raffinant seulement dans les zones "utiles" et en dé-raffinant en dehors de celles-ci. Ceci nous amène au problème de remaillage adaptatif. Au cours de ce travail, nous avons utilisé une méthode prédéterminée de génération de maillage dans laquelle nous choisissons dès le début d'adapter le maillage de manière anisotrope ou isotrope sur une certaine épaisseur autour de l'isovaleur 0 des différents sous-domaines [7].

4. Applications et résultats

Deux types de conditions aux limites (CL) ont été imposés sur un milieu englobant permettant de les appliquer sur l'ensemble particules-MI. Dans une première approche, une pression isotrope a été appliquée (Fig. 2). Dans une deuxième approche, nous avons appliqué des contraintes normales sur deux milieux englobants, et en imposant des conditions de symétrie sur les deux autres frontières du VER (les contraintes sont appliquées de manière faible dans la formulation du problème mécanique). Ces conditions aux limites permettent de mieux s'approcher de la réalité du couplage multi-échelle (Fig.1). Les paramètres physiques et numériques utilisés sont présentés dans le tableau 1.

Dans les cas développés, les particules se déforment au cours du temps et les cous (surface de contact entre deux particules adjacentes) entre les différentes particules et la densité relative augmentent. Nous avons étudié, dans ce travail, l'influence des paramètres numériques sur la conservation du volume des particules. Ces paramètres sont notamment: le coefficient de compressibilité, la période de remaillage, les lois de mélange et le nombre de nœuds. Nous avons constaté que le coefficient de compressibilité a une grande influence sur la conservation de matière. Un coefficient C_k égal à zéro serait idéal pour minimiser la perte de volume. Cependant, il est nécessaire de ne pas imposer une loi de mélange trop raide. Ainsi nous avons appliqué des coefficients de l'ordre de 10^{-10} Pa^{-1} . Concernant la période de remaillage, il est souhaitable d'augmenter ce paramètre afin de ne remailler que s'il est vraiment nécessaire (lorsque les interfaces sont sur le point de sortir de l'épaisseur du maillage fin), afin de limiter le coût de calcul ainsi que la diffusion numérique due au transport des variables lors du remaillage.

Etant donné ce formalisme initial, plusieurs difficultés numériques sont apparues :

- Déraffinement du maillage au niveau des cous. En effet, le fait de travailler avec la fonction distance globale entraîne la disparition de la description des cous entre particules puisqu'elle ne permet de décrire que l'enveloppe de la réunion des particules. L'adaptation de maillage est réalisée au niveau de l'isovaleur zéro de cette fonction. Une méthode de coloration de graphe a alors été utilisée afin de former des familles de particules de sorte que deux particules adjacentes et en contact soient associées à deux fonctions level-set distinctes. Cette méthode permet de conserver la description des cous entre particules tout en limitant très fortement le nombre de fonctions level-set utilisées par rapport à l'utilisation d'une fonction level-set par particule.

- La prise en compte d'une loi de comportement de type puissance pour la modélisation du comportement des particules, sur laquelle est basée la modélisation du premier mécanisme prépondérant au début de la CIC « déformation viscoplastique des particules » rend le problème mécanique à résoudre plus raide.

➤ Le contrôle de la conservation de matière représente un des points importants. L'influence des différents paramètres sur cet observable a été étudiée. Une perte de matière de l'ordre de 2% a été remarquée.

Dans une deuxième approche, un passage à des VER de forme circulaire en 2D a représenté le sujet d'un travail effectué pour des cas isothermes (FIG. 2) mais aussi pour un cycle allant de 800 à 1150°C en une heure (proche de la dernière heure de la montée en pression et température dans un cycle CIC). Les points essentiels ressortant de l'ensemble de cette modélisation numérique à l'échelle mésoscopique du procédé CIC sont: un bon profil d'évolution de la densité relative (FIG. 3), une évolution remarquable des particules de poudre surtout dans le centre du VER et une perte de matière optimisée de l'ordre de 2%.

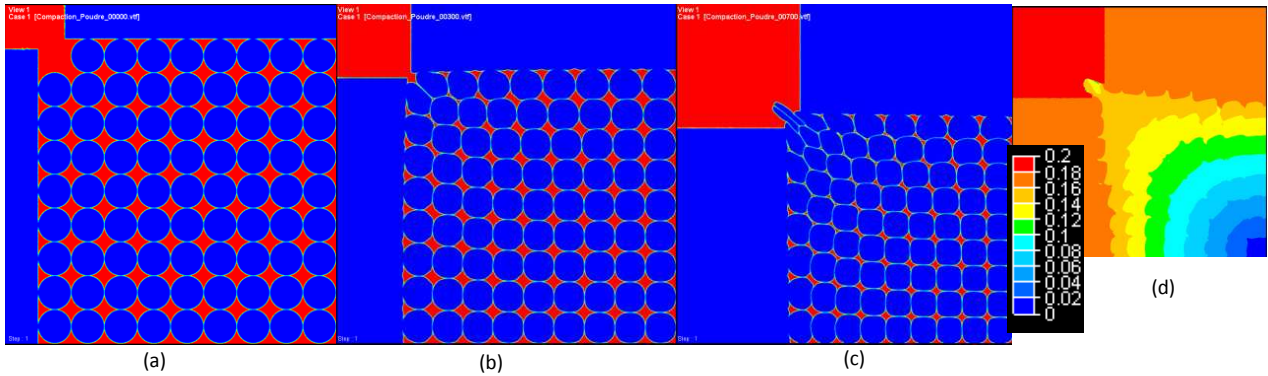


FIG 1. Evolution d'un VER carré en 2D (a) état initial (b) après 20% et (c) après 40% de "déformation" (réduction relative de la surface de VER) (d) norme de la vitesse après 40% de déformation

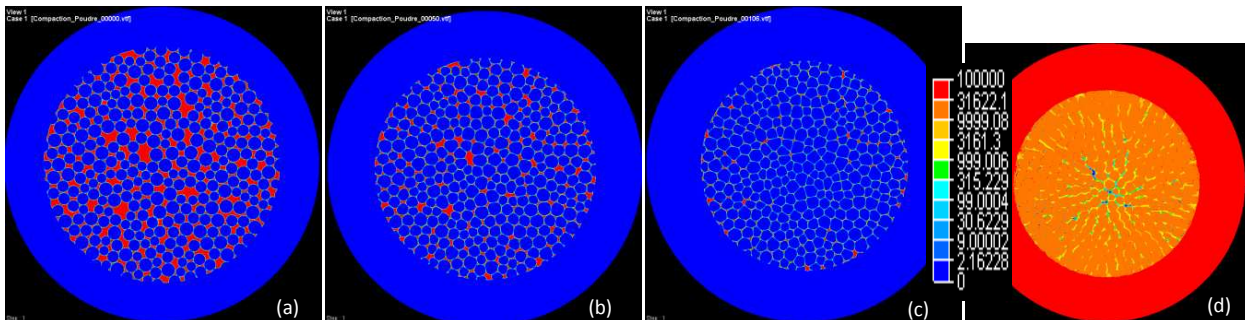


FIG 2. Evolution d'un VER circulaire en 2D (a) état initial (b) après 13% et (c) après 22% de déformation (d) cartographie de la pression après 18% de densification

Tab 1. Paramètres numériques et physiques utilisés

K	MEnglobants	1075 MPa	Pas de temps	1.5 s
	Particules	De 371 MPa jusqu'à 580 MPa	h_{\min} (taille de maille aux interfaces)	0,0012
	MI	10^{-3} MPa	Période de remaillage	30s
m	MEnglobants	0.2	Pression	De 80 MPa jusqu'à 120 MPa
	Particules	De 0.198 jusqu'à 0.495	Nombre d'éléments	302159
	MI	1	Nombre de processeurs	32
C_K	MEnglobants	10^{-10} (Pa ⁻¹)		
	Particules	10^{-10} (Pa ⁻¹)		
	MI	10^{-2} (Pa ⁻¹)		

5. Conclusion

Ce travail a permis de mettre en place une procédure de calcul qui permet de modéliser la compaction d'un ensemble de particules de poudre en 2D et d'interpréter l'évolution de la densité relative résultante. Les travaux de modélisation des différents sous domaine du VER (particules et MI) ont été basés sur la prise en compte d'un comportement de type loi de puissance et la résolution des équations de Navier Stokes compressible. Le modèle numérique retenu est basé sur un domaine fixe dans lequel les interfaces entre les différents sous-domaines ne sont connues qu'implicitement à travers les valeurs d'une fonction distance définie sur l'ensemble du domaine de calcul (approche « level-set »). Les propriétés physiques des différents domaines ont été introduites à travers des lois de mélange. Notre travail futur portera sur l'amélioration des résultats obtenus (conservation de matière et optimisation des paramètres numériques). De plus, une comparaison avec les résultats analytiques existants [9][1] pour un plus grand nombre de particules est envisagée. Nous nous intéresserons également à la compaction d'un volume élémentaire représentatif représentant statistiquement des microstructures réelles en termes de densité, tailles, nombres et morphologie de particules en 2D et 3D. Enfin, les résultats obtenus permettront d'améliorer les modèles macroscopiques traditionnellement utilisés.

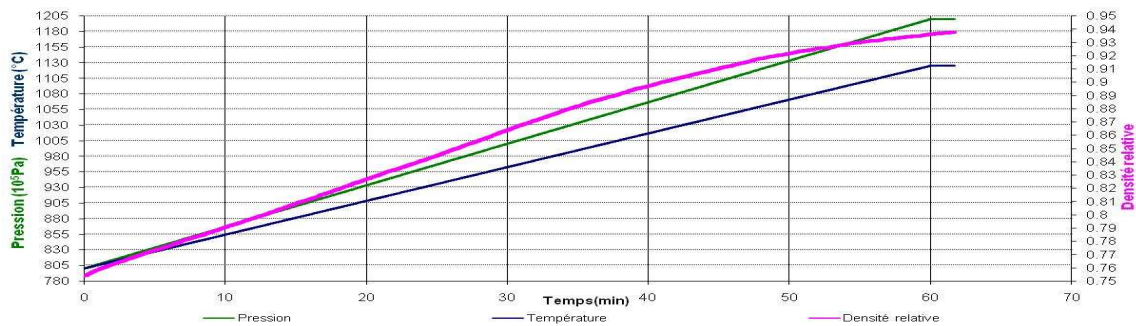


FIG 3. Evolution de la densité relative pour un cycle allant de 800 à 1150°C en une heure

6. Références

- [1] A.S. Helle, K.E. Easterling et M.F. Ashby, Hot-isostatic pressing diagrams: New developments, *Acta Metallurgica*, vol. 33, pp. 2163-2174, 1985.
- [2] D.S. Wilkinson, M.F. ASHBY, Pressure sintering by power law creep, *Acta Metallurgica*, vol. 23, pp. 1277-1285, 1975.
- [3] E. Arzt, M.F. Ashby, and K.E. Easterling, Practical applications of hot-isostatic pressing diagrams: Four case studies, *Metallurgical Transactions A*, vol. 14A, pp. 211–221, 1983.
- [4] O. Bouaziz, C. Dellis, P. Stutz, Creation of a material data file for modelling of an austenitic stainless steel, *Proceedings of the International Workshop on Modelling of Metal Powder Forming Processes*, Grenoble, pp. 67–75, 1997.
- [5] K.T. Kim and Y.C. Jeon, Densification behavior of 316L stainless steel powder under high temperature, *Materials Science and Engineering*, vol. 245 A, pp. 64-71, 1998.
- [6] T.Coupez, H.Digonnet, P.Laure, L.Silva, R.Valette, Approche monolithique pour l'IFS, Chapitre 3 du cours Interaction Fluide Structure, pp.167-202, 2008.
- [7] M.Bernacki, H.Resk, T.Coupez and R.Logé, Finite element model of primary recrystallization in polycrystalline aggregates using a level set framework, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, vol 17, pp.1-22, 2009.
- [8] K. Hitti, P. Laure, T. Coupez, L. Silva, M. Bernacki, Fast generation of complex statistical Representative Elementary Volumes (REVs) in a finite element context, submitted to *Journal of Computational Physics*.
- [9] H.V. Atkinson and S. Davis, Fundamental aspects of hot isostatic pressing: an overview, *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 31A, pp. 2981–3000, 2000.

7. Remerciements

Ces travaux sont effectués avec le support d'AREVA dans le cadre de la Chaire " Matériaux du Nucléaire" d'AREVA-MINES ParisTech.